

ELECTRIC-FIELD ADJUSTING BISTABLE MOLECULAR SYSTEM

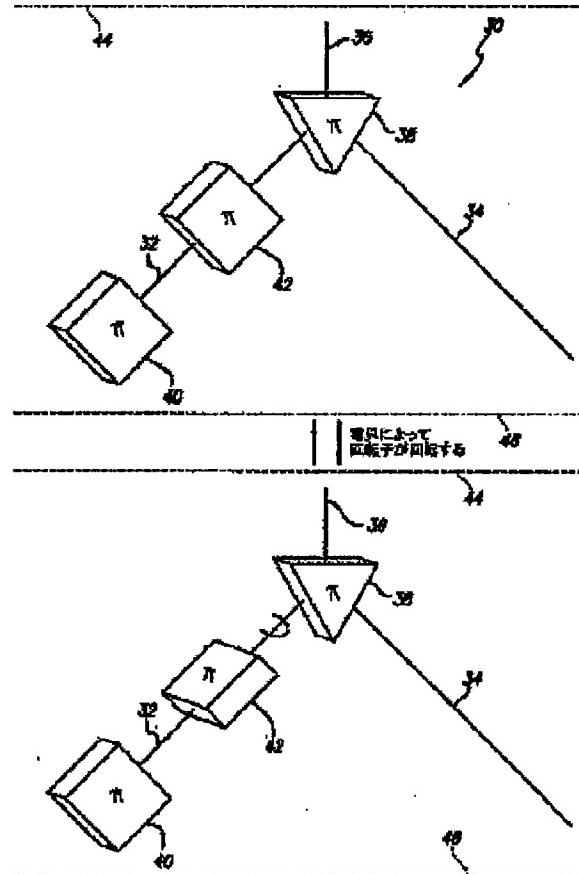
Patent number: JP2003209305
Publication date: 2003-07-25
Inventor: SHIIN XIAO-AN ZHANG; ZHOU ZHANG-LIN; WILLIAMS R STANLEY; VINCENT KENT
Applicant: HEWLETT PACKARD CO
Classification:
- **international:** H01L51/00; B82B1/00; H01L29/06
- **european:**
Application number: JP2002032846 20021112
Priority number(s): US20010013643 20011113

[Report a data error here](#)

Abstract of JP2003209305

<P>PROBLEM TO BE SOLVED: To provide a molecular system in which switching from a first condition to a second condition is performed at a moderate speed by avoiding chemical oxidization and/or reduction.

<P>SOLUTION: This molecular system has three branching of a first branching, a second branching and a third branching. One end of each branching is connected to a junction unit to form a Y-shape. The first branching and the second branching are on one side of the junction unit, and the third branching is on the other side of the junction unit. The first branching (32) contains a first stator unit (40) in its backbone. The junction unit (38) has a second stator unit (38). Further, the first branching (32) contains a rotatable rotor unit (42) between the first and the second stator units in its backbone. The second branching (34) contains an insulating support base for providing the second branching (34) whose length is substantially equal to that of the first branching (32) in its backbone. The rotor unit (42) rotates between two conditions as a function of an electric field applied from outside. <P>COPYRIGHT: (C)2003,JPO



Data supplied from the esp@cenet database - Worldwide

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開2003-209305

(P2003-209305A)

(43) 公開日 平成15年7月25日(2003.7.25)

(51) Int.Cl.⁷
H 01 L 51/00
B 82 B 1/00
H 01 L 29/06

識別記号
Z NM
6 0 1

F I
B 82 B 1/00
H 01 L 29/06
29/28

テマコード(参考)

Z NM
6 0 1 N

審査請求 未請求 請求項の数 1 OL (全 20 頁)

(21) 出願番号 特願2002-328464(P2002-328464)
(22) 出願日 平成14年11月12日(2002.11.12)
(31) 優先権主張番号 10/013643
(32) 優先日 平成13年11月13日(2001.11.13)
(33) 優先権主張国 米国(US)

(71) 出願人 398038580
ヒューレット・パッカード・カンパニー
HEWLETT-PACKARD COMPANY
アメリカ合衆国カリフォルニア州パロアルト ハノーバー・ストリート 3000
(72) 発明者 シーン・ツアオーアン・ツアン
アメリカ合衆国カリフォルニア州94086,
サニーベイル, グランド・ファー・アベニュー・ナンバー2・689
(74) 代理人 100063897
弁理士 古谷 騎 (外3名)

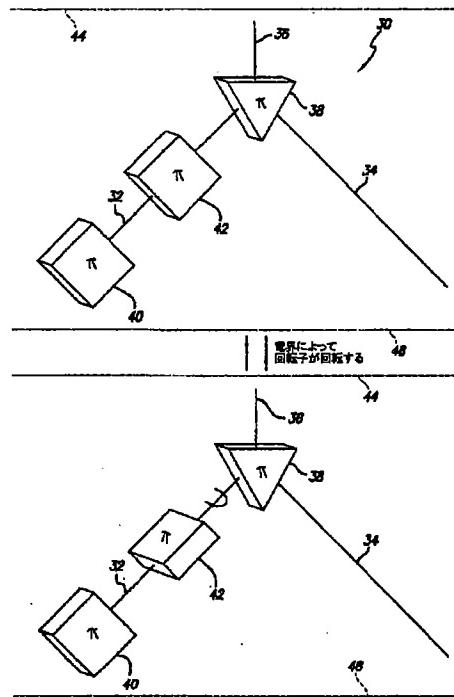
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 電界調整式双安定分子システム

(57) 【要約】

【課題】 化学的な酸化及び/又は還元を回避し、第1の状態から第2の状態に適度な速度で切り換えることができる分子システムを提供する。

【解決手段】 本願発明の分子システムは、第1の分岐、第2の分岐及び第3の分岐の3つの分岐を有し、各分岐の一端が接合ユニットに接続されて「Y」字形状を形成し、第1の分岐及び第2の分岐が前記接合ユニットの一方の側にあり、第3の分岐が前記接合ユニットのもう一方の側にある分子システムであって、第1の分岐(32)が、そのバックボーンに、第1の固定子ユニット(40)を含み、接合ユニット(38)が、第2の固定子ユニット(38)を有し、さらに第1の分岐(32)が、そのバックボーンにおいて、第1及び第2の固定子ユニットの間に回転可能な回転子ユニット(42)を含み、第2の分岐(34)が、そのバックボーンに、第1の分岐(32)の長さと実質上等しい長さの第2の分岐(34)を設けるための絶縁性支持基を含み、回転子ユニット(42)が、外部から印加される電界の関数として2つの状態間で回転することを特徴とする。



1

(特許請求の範囲)

【請求項1】 第1の分岐、第2の分岐及び第3の分岐の3つの分岐を有し、各分岐の一端が接合ユニットに接続されて「Y」字形状を形成し、前記第1の分岐及び前記第2の分岐が前記接合ユニットの一方の側にあり、前記第3の分岐が前記接合ユニットのもう一方の側にある分子システムであって、

(a) 前記第1の分岐(32)が、そのバックボーンに、

(38) が第2の固定子ユニット(38)を有し、さらに前記第1の分岐(32)が、そのバックボーンにおいて、前記第1の固定子ユニット(40)と前記第2の固定子ユニット(38)の間に回転可能な回転子ユニット(42)を含み

(b) 前記第2の分岐(34)が、そのバックボーンに、前記第1の分岐(32)の長さと実質上等しい長さの前記第2の分岐(34)を設けるための絶縁性支持基を含み、前記回転子ユニット(42)が、外部から印加される電界の周波数として2つの状態間で回転する分子システム

【発明の詳細な説明】

(0001)

【発明の属する技術分野】本願発明は、概して、その機能長スケールがナノメートルで測定される電子及び光学素子に関する。より詳細には、本願発明は、電子的又は光学的な切換を行いうものとして分類される分子に関する。マイクロメートルスケール及びナノメートルスケールの両方の電子及び光学素子を、本明細書の教示したがって構成することができます。

[0002]

【関連特許出願の相互参照】本願発明は、2001年7月3日に出願された米国特許出願第09/898,799号の一部係属出願であり、その米国特許出願は2001年4月27日に出願された米国特許出願第09/844,862号の一部係属出願であり、またそれは2001年3月29日に出願された米国特許出願第09/823,195号の一部係属出願であり、さらにそれは2001年1月12日に出願された米国特許出願第09/759,438号の一部係属出願であり、またそれは2000年12月14日に出願された米国特許出願第09/738,793号の一係属続出願である。

【0003】本願発明は、大きな双極子モーメントを有し、固定化された分子の少なくとも2つの他の部分（固定子）と結合する少なくとも1つの回転可能な部分（1つ又は複数の回転子）を含む特定の分子システム、分子機械素子に関する。本願発明で開示される分子システムは、ある一つの状態から異なる状態に切り換わり、それによって分子の電子的特性及び／又は光学的特性が変化することを特徴とする。

[0004]

【従来の技術】分子電子工学の分野は初期の段階にある。これまでに、分子を電子スイッチとして利用する2

2
つの説得力のある実例が発表されている（例えば非特許文献1及び2参照）。しかし、この話題を取り巻く科学界には大きな憶測と興味が存在する。発表されている成果によれば、ロタキサン及びカテナンと呼ばれる分子が、2つの金属電極間に捕捉され、その分子を横切るよう正のバイアスをかけることにより、オン状態からオフ状態に切り換わる。オン状態及びオフ状態では、ロタキサン及びカテナンの場合にそれぞれ、約100倍及び5倍だけ抵抗率が異なる。

10 【0005】ロタキサンの場合の主な問題点は、それが不可逆的なスイッチであることであった。それは一度しか他の状態に切り換えることができなかつた。したがつて、それはプログラマブル読取専用メモリ（PROM）において利用することができるが、ROMのような素子、並びに欠陥に対して許容度のある通信及び論理ネットワークのような構成変更可能なシステムに利用することができない。さらにロタキサンは、スイッチが切り換えられるようになる前に、酸化反応及び／又は還元反応が行われる必要がある。これは、スイッチを切り換えるために

20 相当な量のエネルギー消費を必要とする。さらに、ロタキサン及び関連する化合物の大きさ及び複雑な特性によって、分子の切換えに要する時間が長くなる可能性がある。カテナンの場合の主な問題点は、オン／オフ比が小さく、切換え時間が遅いことである。

[0006]

【非特許文献1】C. P. Collier他によるScience、Vol 285、1999年7月16日、pp. 391～394

【非特許文献2】C. P. Collier他によるScience、Vol 289、2000年8月18日、pp.1172～1175

[0007]

【発明が解決しようとする課題】したがって、本願発明の目的は、化学的な酸化及び／又は還元を回避し、第1の状態から第2の状態に適度な速度で切り換えることができ、ROMのような素子を製造できるように可逆的であり、種々の電子及び／又は光学素子において使用することができる分子システムを提供することである。

[0008]

【課題を解決するための手段】本願発明によれば、ナノメートルスケール、又は単にナノスケールの可逆的な電子及び光スイッチのための分子システムが提供され、具体的には電界によって分子配座の変化又は互変異性化を介して生じるバンドギャップの変化が誘導される電界起動式分子スイッチのための分子システムが提供される。バンドギャップを変化させるために、化学結合の変化を介して延在する共役を変化させることは、1つの回転部分（回転子）と、その間に回転子が取り付けられている2つ以上の固定部分（固定子）とを有する分子システムを提供することにより達成される。

【0009】本願発明の分子システムは、それぞれの一方の端部が接合ユニットに接続されて「Y」字形状を形成する。

成するように、3つの分岐（第1、第2及び第3の分岐）又は3つの部分を有してなる。第1及び第2の分岐は接合ユニットの一方にあり、すなわち「Y」字の2つの分枝部を形成し、第3の分岐は接合ユニットの反対側にあり、すなわち「Y」字の残る1つの分枝部を形成する。第1の分岐はそのバックボーン又は主構造に第1の固定子ユニットからなり、第1の分岐はさらに、そのバックボーンにおいて、第1の固定子ユニットと第2の固定子ユニットの間に、第1及び第2の固定子に対して回転する回転子ユニットを含む。回転子ユニットは、外部から印加される電界の関数として2つの状態間で回転する。第2の分岐は、そのバックボーンに、第1の分岐の長さと実質上等しい長さの第2の分岐を設けるための絶縁性支持基を含む。

【0010】本願発明は、クロスバー及び他の回路を形成するために容易に組み立てができる可逆的な分子電子及び／又は光スイッチを提供する。クロスバー回路は、先に挙げた一連の特許出願及び発行された特許に記載されている。その回路は、メモリ、論理及び通信機能を提供する。電子スイッチの一例は、いわゆる交差ワイヤ素子であり、それは1つのワイヤが別のワイヤと0°以外の角度で交差する接合部を形成する一対の交差ワイヤからなり、少なくとも1つの接続子化学種又は接続子分子(connector species)がその接合部において一対の交差ワイヤを接続する。その接合部は、多層のためにナノメートル以上の機能スケールを有する。その接続子化学種は、本明細書において開示され、特許請求の範囲に記載される分子システムを含む。

【0011】本願発明は、新しいタイプの切換え機構、すなわち電界により分子の回転可能な中間部分（回転子）の回転が誘導される切換え機構を導入する。したがって分子は、スイッチを切り換える際に酸化も還元もされず、それによって化学結合を破壊する必要性、及び不可逆的な反応を開始する可能性が回避される。またその分子の可動部分は非常に小さいので、切換え時間又はスイッチング時間は非常に短くなる。またその分子は、ロタキサン及び関連する化合物よりも非常に単純であり、したがって容易に、かつ低成本で製造することができる。

【0012】本願発明の素子は、全般に電界素子と見なされ、電気化学素子に向けられる初期の実施形態（上記の関連する特許出願及び特許に記載される）から区別されるべきものである。

【0013】本願発明の開示は、ある一つの状態から異なる状態に切り換わるある種の分子に関し、導電率が変化することを特徴とするという点で上記の特許出願及び特許よりも優れた改善形態である。分子スイッチの3分岐又は「Y」字形状が、回転子の双極子運動と、電極間の電界の方向との間の光学的な整列状態を生成する。さ

らに「Y」字形状の配列によって、回転子の双極子と切換え電界との間の相互作用の強度を最大にすることができる。

【0014】本願発明の開示は全般に、その機能長スケールがナノメートル以上で測定される電子素子又は光学素子に関連し、より具体的には電子的及び光学的な切換えの両方を提供するものとして分類される種類の分子に関連する。マイクロメートルスケール及びナノメートルスケール両方の電子素子及び／又は光学素子を、本明細書に記載される教示にしたがって構成することができる。

【0015】

【発明の実施の形態】定義

本明細書において使用される用語「自己組織化(self-assembled)」は、システムの構成要素の類似性のために自然にいくつかの幾何学的パターンを選ぶシステムを指す。このシステムは、この構成を選ぶことにより、そのエネルギーの少なくとも局所的な最小値を達成する。

【0016】用語「一度だけ構成可能(single configurable)」は、スイッチが酸化反応又は還元反応のような不可逆的なプロセスを通して一度だけその状態を変更できることを意味する。そのようなスイッチは、たとえばプログラマブル読取専用メモリ(PROM)の基本構成要素とすることができます。

【0017】用語「構成変更可能(reconfigurable)」は、スイッチが酸化あるいは還元のような可逆的なプロセスを介して何度もその状態を変更することができることを意味する。言い換えると、そのスイッチは、ランダムアクセスメモリ(RAM)内のメモリビット又はディスプレイ内のカラーピクセル又は有色画素のように、何度も開閉可能である。

【0018】分子に適用される用語「双安定(bi-stable)」は、分子がエネルギー（又は活性化）障壁によって分離されている2つの比較的低いエネルギー状態を有することを意味する。その分子は、ある一つの状態から他の状態に不可逆的に切り換えられるか（一度だけ構成可能）、又はある一つの状態から他の状態に可逆的に切り換えられるか（構成変更可能）のいずれの場合がある。

【0019】ミクロンスケール寸法は、1マイクロメートルから数マイクロメートルの範囲のサイズの寸法を指す。

【0020】サブミクロンスケール寸法は、1マイクロメートルより小さく0.05マイクロメートルまでの範囲の寸法を指す。

【0021】ナノメートルスケール寸法は、0.1ナノメートルから50ナノメートル(0.05マイクロメートル)の範囲の寸法を指す。

【0022】ミクロンスケール及びサブミクロンスケールのワイヤは、幅又は直径が0.05から10マイクロメート

ルの寸法を有し、高さが数十ナノメートルから1マイクロメートルの範囲であり、長さが数マイクロメートル以上である棒状又は帯状の導体又は半導体を指す。

【0023】「HOMO」は「最高被占軌道(highest occupied molecular orbital)」に対する一般的な化学的略称であり、一方「LUMO」は「最低空軌道(lowest unoccupied molecular orbital)」に対する一般的な化学的略称である。HOMO及びLUMOは、分子内の電子伝導のための役割を果たし、HOMO及びLUMOと、他のエネルギー的に近い分子軌道との間のエネルギー差は分子の色を得るのための役割を果たす。

【0024】光スイッチは、本願発明の文脈において、人間の眼によって検出可能な電磁放射の内外両方、たとえば遠赤外線(IR)から深紫外線(UV)までの範囲の分子の電磁特性の変化を含む。光学的切換えは、電磁放射の吸収、反射、屈折、回折及び拡散散乱のような特性の変化を含む。

【0025】用語「透明(transparency)」は、可視スペクトル内において定義され、着色剤がスペクトル成分を吸収する領域を除いて、光学的に、着色剤内を通過する光が妨害又は変更されないことを意味する。たとえば分子着色剤が可視スペクトルにおいて光を吸収しない場合には、その着色剤は無色透明を有するように見える。

【0026】用語「全環境照明視認性(omni-ambient illumination viewability)」は、本明細書において、眼が反応する任意の環境照明条件下の視認性として画定される。

【0027】従来技術の交差ワイヤスイッチに関する基本情報

基本的な素子機構が図1A及び図1Bに示され、上記の関連特許出願及び特許において詳細に記載されている。*

* 交差ワイヤスイッチ、クロスワイヤスイッチ10は、それぞれ金属又は半導体いずれかのワイヤであり、0°以外のある角度で交差する2本のワイヤ12、14を含む。これらのワイヤ間には、図1A及び図1BにRで示されている分子又は分子化合物16の層が存在する。2本のワイヤ12、14の交差部において挟まれている特定の分子18(Rで示される)はスイッチ分子と見なされ、本願発明では接合部と呼ばれる場合もある。ワイヤ間に適切な電圧が印加されると、スイッチ分子は酸化又は還元される。

分子が酸化(還元)されると、電荷が釣り合うように第2の化学種が還元(酸化)される。ここでこれらの2つの化学種はレドックス対と呼ばれる。この素子の一例は、ある一つの分子が還元され、第2の化学種(レドックス対のもう一方)が酸化されることであろう。別の例では、ある分子が還元され、ワイヤの一方が酸化される。第3の例では、ある分子が酸化され、ワイヤの一方が還元される。第4の例では、一方のワイヤが酸化され、他のワイヤに関連する酸化物が還元される。全ての場合に、酸化又は還元は、トンネル現象距離又は2つのワイヤ間のトンネル障壁の高さに影響を及ぼし、それによってワイヤ接合部にわたる電荷輸送の速度を指数関数的に変更し、スイッチのための基本構成要素として機能する。

【0028】これらの素子によって実行される電気的な動作は、ワイヤ(電極)のタイプと、利用されるワイヤ間の材料とによって概ね決定される。表1は、図1A及び図1Bのワイヤ12、14の種々の組み合わせから製造される場合がある種々のタイプの素子を示す。

【0029】

【表1】ワイヤ(電極)材料

素子タイプ	金属-金属 (同じ)	金属-金属 (異なる)	金属-半導体	半導体-半導体 (p-n接合)	半導体-半導体 (ヘテロ接合)
抵抗	×	×	×		
トンネル抵抗	×	×	×		
共鳴トンネル抵抗	×	×	×		
ダイオード		×	×	×	×
トンネルダイオード		×	×	×	×
共鳴トンネルダイオード		×	×	×	×
バッテリ		×	×		

【0030】ワイヤ(電極)間に使用されている分子又は材料によって、各接合部は、ワイヤに直に接触して、以下に記載されるタイプの電気的な機能を表すか、あるいは接合部は電気的に2本のワイヤを互いに接続あるいは切断するように動作する切換え機能を有するかのいずれかである。このスイッチは、一度だけ構成可能か、又

は構成変更可能かのいずれかである。第1の場合には、スイッチの最初の状態は開いているか、又は閉じている。第2の場合には、適切な閾値を超えて、スイッチの電圧の極性及び大きさを反復することにより、適切に選択された材料又は分子を可逆的に酸化又は還元し、スイッチを何度も開閉することが可能である。いずれの場合

でも、閉じられているとき、ワイヤ間に形成されている電気的接続のタイプは、ワイヤ（又は電極）が製造される材料、ならびにワイヤ間の分子又は材料の同一性に依存する。

【0031】上記の表1は、電極材料と、接合部において使用される材料又は分子との種々の組み合わせから得られる種々のタイプの機能の一覧表である。抵抗は、線形の電流-電圧特性を有し、基本的にワイヤ間に短絡を形成するために、種々のタイプのワイヤ間の接合部を意図的に過還元することにより形成される。このプロセスの逆は、接合部を過酸化することであり、それは接合部の位置において、そのワイヤ内の局在化した領域のワイヤを消費し、ワイヤを実質的に破壊する（開回路を形成する）。トンネル抵抗は、ワイヤ間に薄い、約2ナノメートル厚の絶縁性障壁を保持し、指数関数的な電流-電圧特性を有する。接合部分子又は材料が、電気的絶縁性障壁のバンドギャップ内に、接合部に電気的にバイアスをかけることにより達成されることができる明確なエネルギー状態を有する場合に、ワイヤ間の接続は、共鳴トンネル現象のプロセスによって支配される電流の流れを示すことが可能である。共鳴トンネル現象は、そうでなければ、トンネル抵抗の指数関数的な電流-電圧特性に1つ又は複数の変曲点が生成される。ダイオードは、他の方向よりも一方においてより容易に電流を流し、したがって正及び負の電圧の場合に電流-電圧特性の非対称性を有する接合である。トンネルダイオードは、ダイオードの正-負電圧の非対称性と、トンネル抵抗の指数関数的な電流-電圧特性との両方を有する。共鳴トンネルダイオードは、正-負電圧の非対称性を有するとともに、電圧の大きさが増加するある限られた範囲にわたって、電流の大きさが実際には減少するような電流-電圧特性のピークを有する、すなわち負の微分抵抗率として知られる現象を有する。一般に、上記のプロセスによって形成されるワイヤ間の任意の現実の接合部は、実際には上記の電気的機能のうちの2つ以上を有し、それらの有効な回路素子が直列に接続される。

【0032】したがって、本願発明は、組み立てられる回路から望まれる素子特性に応じて、任意の数の金属又は半導体ワイヤ/分子の組み合わせを利用して達成される。

【0033】ワイヤ電極の従来技術の製造に関する基本情報

プロセスによって画定されるワイヤ（従来の電子回路処理技術によって形成されるワイヤとして画定され、ワイヤは典型的には回路の一部として基板上に形成される）直径が数マイクロメートルから1マイクロメートル（マイクロメートルスケールとして定義される）の範囲を有するか、又は直径が1マイクロメートル以下40ナノメートル（サブミクロンスケールとして定義される）の範囲を有する金属及び半導体ワイヤが、リソグラフィ（光、

紫外線又は電子ビーム）技術を含む、十分に確立された技術を利用して形成される。これらのワイヤは、円形の断面の場合もあるが、標準的には帯状又は長方形の断面を有し、ワイヤの幅は、そのワイヤを画定するために使用されるリソグラフィプロセスによって決定され、その高さはリソグラフィによって画定される領域に付着される材料の量によって決定される。

【0034】化学的に形成されるワイヤ（これらのワイヤは、従来の電子工学的処理技術以外の技術によって形成され、ワイヤは典型的には、回路基板の一部ではなくバルク材料として形成される）

金属及び半導体ナノワイヤは、直径が50ナノメートル未満（典型的には2ナノメートルから20ナノメートル）で、長さが0.1マイクロメートルから50マイクロメートル（典型的には5マイクロメートルから10マイクロメートル）の範囲内にあるワイヤとして定義される。これらは、以下に挙げる参考文献に記載されている多数の技術のうちの任意の1つを利用して化学的に形成される。

【0035】半導電性元素ゲルマニウムの半導体ナノワイヤを製造するための技術として報告された一例では、四塩化ゲルマニウム及びフェニル塩化ゲルマニウム（IV）を、トルエン溶媒内に分散させたナトリウム金属と、数日間、不活性環境下の密閉容器内で約300°Cの温度で反応させている。その配合により、直径が3ナノメートルから30ナノメートルで、長さが0.5マイクロメートルから10マイクロメートルの単結晶ゲルマニウムナノワイヤが製造される。

【0036】半導電性元素シリコンの半導体ナノワイヤを製造するための技術として報告された第2の例では、シリコン元素及び鉄元素を含むターゲットをレーザにより蒸発させている。ターゲットは1300°Cの真空オーブン内に配置され、蒸発プロセス中、オーブン内に不活性ガスが流れる。この技術によって、直径が20ナノメートルから30ナノメートルの範囲にあり、長さが1マイクロメートルから20マイクロメートルの範囲にあるシリコンワイヤが製造される。

【0037】金属元素である金からなる金属ナノワイヤを製造するための技術として報告された一例では、陽極エッティングされた酸化アルミニウム薄膜の細孔内に金ワイヤを電気化学的に成長させている。酸化アルミニウムは酸性溶液で溶解され、金ナノワイヤが残され、その後回収される。このようにして成長させた金ナノワイヤは、直径が20ナノメートルから30ナノメートルの範囲にあり、長さが0.5マイクロメートルから5マイクロメートルの範囲にあることを特徴とする。

【0038】種々の金属及び半導電性材料からなるナノワイヤが種々の方法により形成される。これらの素子のいくつかは、ドープドシリコン、不純物をドープされたシリコンのようなドープド半導体ワイヤを必要とする。

【0039】Siワイヤの場合、そのワイヤが物理的に形

成されるときに、ワイヤにドープすることができる。この場合、ワイヤが形成される際に、反応容器内にドーパントを加える必要がある。たとえば上記のレーザアブレーション／真空オーブンによる形成技術では、ホスフィン(PH_3)又は水素化ヒ素(III)(AsH_3)のような少量のドーパントガスが、レーザアブレーション／ワイヤ形成プロセス中に真空オーブン内を流れる不活性ガス(たとえばアルゴン)に追加される。

【0040】反対に、これらのワイヤを、適切な分子、それぞれp型又はn型の導体にするための電子求引基(三フッ化ホウ素(BF_3)のようなルイス酸)あるいは電子供与基(アルキルアミンのようなルイス塩基)のいずれかで表面をコーティング、被覆することにより変調ドープすることができる。後に掲載されるワイヤ準備方法を参考されたい。図1Bはワイヤ12上のコーティング又は被覆20と、ワイヤ14上のコーティング22とを示す。コーティング20、22には、変調ドーピングコーティング、トンネル障壁(たとえば酸化物)又は他のナノスケールの機能的に適した材料を利用することができます。代替的にはワイヤ12、14自体が、1つ又は複数のR化学種16でコーティングされ、ワイヤ交差部R_s18が形成される。さらに別法では、ワイヤ12、14に、たとえば、分子化学種20、22をそれぞれコーティングすることができ、以下に説明するように、一方又は両方のワイヤがコロイド懸濁液を形成するために懸濁される。

【0041】変調ドーピングを介してワイヤをドープするため、ワイヤの表面においてSi-O-H基に共有結合される有機又は無機分子を利用して、ワイヤの表面を化学的に機能化させる必要がある。シリコンナノワイヤが空気に露出されると、 SiO_2 の薄い表面層(1 nm)が自然に形成され、 SiO_2 ／空気の境界部において、 SiO_2 表面はSi-O-H結合によって終端される。Si-O-H基に結合されるか、又はそれを置換する基は、限定はしないが、R-Si(CH₃)₂(OCH₃-)_x、R-Si(CH₃)₂(OCH₂CH₃-)_x、R-Si(CH₃)₂Cl_{3-x}等を含む。この場合に、Rは、電子求引基(ルイス酸)又は電子供与基(ルイス塩基)を含むことができる有機又は無機成分を表す。 SiO_2 で保護されたシリコン表面に分子を結合するこの化学作用は確立されている。 SiO_2 で保護されたシリコン表面に分子を結合するための1つの確立された例示的な反応は以下のとおりである。 $\text{Si}-\text{O}-\text{H}_{(\text{surface})} + \text{R}-\text{Si}(\text{CH}_3)_2\text{Cl} \rightarrow \text{Si}-\text{O}-\text{Si}(\text{CH}_3)_2\text{R} + \text{HCl}$

【0042】他の半導体ワイヤは、有機アミン、有機チオール、有機ホスフェート等で機能化することができる。

【0043】半導体ナノワイヤは変調ドープされている(すなわち化合物がワイヤ上に吸着するときに、シリコンナノワイヤの導電率の変化によって指示される)。たとえば、Yi Cui等による「Doping and Electrical Tran

sport in Silicon Nanowires」、The Journal of Physical Chemistry B, Vol. 104, No. 22, pp. 5213-5216, June 8, 2000. Yi Cui等による「Functional Nanoscale Electronic Devices Assembled Using Silicon Nanowire Building Blocks」、Science, Vol. 291, pp. 851-853, 2 Feb. 2001及びYi Cui等による「Nanowire Nanosensors for Highly Sensitive and Selective Detection of Biological and Chemical Species」、Science, Vol. 293, pp. 1289-1292, 17 Aug. 2001を参照されたい。

【0044】金属ナノワイヤのような他のナノワイヤの場合、そのワイヤを、R-SH(金又は銀ワイヤの場合)、R-NH₂(プラチナワイヤ及びパラジウムワイヤの場合)、あるいはR-CO₂H(Al₂O₃をコーティングされたアルミニウムワイヤ又はチタンワイヤのような他の金属の場合)で化学的に機能化することができる。ただしR基は、当業者が溶媒内にコロイドとしてワイヤを分散させることができるようにいくつかの有機成分を示す。一例では、金ワイヤをドекサンチオール(C₁₂H₂₂SH)で機能化することができる。ドекサンチオールは、ワイヤに薄い表面トンネル障壁をもたらすだけでなく、ワイヤが、ヘキサン又はクロロフォルムのような単純な有機溶媒に分散されるように作用する。

【0045】従来技術のワイヤの準備方法に関する基本情報

以下の材料は、挙げられる参考文献にしたがい、ナノワイヤとして形成することができる。

シリコン：A. M. Morales等による「A Laser ablation method for the synthesis of crystalline semiconductor nanowires」、Science, Vol. 279, pp. 208-211, Jan. 9, 1998

ゲルマニウム：J. R. Heath等による「A liquid solution synthesis of single crystal germanium quantum wires」、Chemical Physics Letters, Vol. 208, pp. 263-268, June 11, 1993

金属ナノワイヤ：V. P. Menon等による「Fabrication and Evaluation of Nano-electrode Ensembles」、Analytical Chemistry, Vol. 67, pp. 1920-1928, Jul. 1, 1995

機能化シリコン：T. Vossmeyer等による「Combinatorial approaches toward patterning nanocrystals」、Journal of Applied Physics, Vol. 84, pp. 3664-3670, Oct. 1, 1998(多数の参考文献のうちの1つ)

金ナノ構造の表面の機能化：D. V. Leff等による「Thermodynamic Size Control of Au Nanocrystals: Experiment and Theory」、The Journal of Physical Chemistry, Vol. 99, pp. 7036-7041, May. 4, 1995

【0046】分子切換え成分、構成要素は、再び素子の所望の特性に応じて、任意の数の異なる種類の分子に由

来る。分子の重要な要件は、それらが2本のワイヤに挟まれるとき、ワイヤの間に電圧を印加することにより電気化学的に変化される（すなわち酸化又は還元される）ことである。分子成分がそのように変化、変更されるとき、その最終的な効果は、2本のワイヤ間のトンネル障壁が変更され、電流量が変更されることにある。これは、メモリ、論理演算ならびに通信及び信号ルーティングネットワークに利用されるスイッチの基礎を形成する。分子スイッチは分子のレドックス対を含むことができ、その場合に、電圧を印加することにより、分子の一方が還元され、他方が酸化される。このような分子レドックス対の一例として、ニッケロセン（ジシクロペンタジエニルニッケル）あるいは $Cp_2 Ni + Bu_4 NPF_6 \rightarrow Cp_2 Ni^- + Bu_4 NPF_6^+ (-1.7V)$



[0048] 特に、ニッケロセン系は、溶液相サイクリックボルタントリによって精査されるように、還元が大きく、還元による電位差が大きく、非対称である点で興味深い。このような非対称性は、安定及び書換可能磁気メモリのための基礎を形成する磁化ヒステリシス曲線に類似している。しかしながら、溶液相ボルタントリによって精査されるように、酸素の存在時に、ニッケロセンの還元は不可逆的である。いずれの場合にも、このシステム又は系の酸化あるいは還元は、分子が挟まる2本のワイヤ間のトンネル障壁を変化させるであろう。したがってこの系は、構成変更可能な分子スイッチ又は一度だけ構成可能な分子スイッチのいずれとしても動作可能である。メタロセン系については、たとえばJ. D. L. Holloway等による「Electron-transfer reactions of metallocene: Influence of metal oxidation state on structure and reactivity」、Journal of the American Chemical Society, Vol. 101, pp. 2038-2044, April 11, 1979を参照されたい。

[0049] 接続子化学種16は、溶液電気化学反応又は固体接合状態の電流-電圧特性のいずれから得られるその電流-電圧特性の著しい、すなわち測定可能なヒステリシスを示す材料を含む。このような化学種の一例として、メタロセン、ロタキサン、擬似ロタキサン及びカテナンをあげることができ、これらは分子内の水素結合に基づく。このような分子は開示を目的とするには有用ではあるが、単純な分子内の水素結合力は、先に説明したように、ある特定の条件下では比較的容易に超えられてしまう。

[0050] 図2に示すように、スイッチ10は、二次元のアレイにおいて繰り返され、複数のスイッチ、すなわちスイッチのアレイ60を形成してクロスバースイッチを

形成する。図2は 6×6 のアレイ60を示すが、本願発明はそのようなアレイ内の特定の素子の数、すなわちスイッチの数に限定されない。1つの点、たとえば点2 bへのアクセスは、ワイヤ2及びワイヤb上に電圧を印加し、上記のように、その接合部において分子化学種18の状態を変化させることによりなされる。したがって各接合部へのアクセスを利用して、本願発明の教示にしたがい、その予め選択された接合部のみを容易に構成することができます。クロスバースイッチアレイ60の動作の詳細は、先に引用した米国特許第6,128,214号にさらに説明されている。

【0051】光スイッチ

光スイッチは、同時係属中の____に出願された米国特許出願第____号（代理人整理番号PD-10005747-1）にさらに詳細に記載されている。その特許出願から得られる一般的な例が本願発明において図3に示され、この図は、少なくとも1つの着色剤層301を組み込むディスプレイ画面300を示す。着色剤層301は、以下にさらに詳細に記載するが、一般的に「分子着色剤（molecular colorant）」と呼ばれ、本願発明の電界切換え可能、かつ構成変更可能な染料又は顔料分子を利用する画素アレイからなる。各染料分子又は顔料分子は、画像の色（たとえば黒色）と透明との間、あるいは2つの異なる色（たとえば赤色と緑色）の間で電界により切換え可能である。

【0052】簡単に図3Aを参照すると、着色剤層301は、選択された1組の分子が1つの画素と相互に関連するように配列されている双安定分子から形成されるアドレス指定可能な画素アレイである。着色剤層301は、ディスプレイの意図された背景色（たとえば白色）を有する背景基板303上にコーティングされている薄い層である。基板303は、層間の電圧降下を最小限に抑えながら、良好な白色と不透明度をもたらすポリマー結合剤内の高誘電性顔料（たとえばチタニア）を含む。したがって着色剤層301と基板303の層に配列された組み合わせは、紙の上のインクの層と全く類似する。空白状態、すなわち消去された状態では、各分子はその透明な向きに切り換えられる。すなわち「インクの層」は視認できない。背景（たとえば白色画素）は、着色剤層301の分子が透明な向きに切り換えられた画素領域において透けて見える。透明なプラスチック又はガラスのような透明な透過視認（view-through）層305が、適切な保護をもたらすように、着色剤-背景サンドイッチ構造の上方に設けられる。透過視認層305は、それに取着され、着色剤層301の上方に配置され、画素の列又は行を起動するための透明電極アレイ307を有する。背景基板303は、それに取着され、画素の列又は行を起動するための相補的な電極アレイ309を有する（個々の画素のマトリクスアドレス指定及び電界による書き込みのための電極アレイ307、309の層形成の特定の実装形態は、従来の電気工学の習慣にしたがって変更できることは当業者であれば理解

できるであろう）。随意的に、画素は、当分野においてよく知られているような薄膜トランジスタ（TFT）ドライバ技術を利用することにより重ね合わされる。

【0053】このディスプレイ300は、ハードコピー印刷と同じコントラスト及び色を可能にする。分子着色剤は、その寸法及び質量が非常に小さく、解像度及び着色剤切換え時間が、電界書き込み用電極及び回路によってのみ制限されるようになるので理想的である。インクと同様に、着色剤層301は、サブミクロロンからミクロロンの範囲の薄い層において十分な密度を持ち、論理状態間で着色剤を切り換えるために必要とされる電界電圧を低減できる可能性があり、それによって低コストの駆動回路を利用することができるようになる。

【0054】このようなディスプレイにおいて使用するための適切な構成変可能な双安定分子が、以下に開示され、本願発明において特許請求される。概して、これらの分子は、π軌道電子の共役の範囲によって決定される光学特性（たとえば色）を有する。色又は透明度を含む分子の光学特性は、分子を横切って印加される電界の極性とともに変化し、電界がかけられない場合でも彩色的には安定なままである。分子間の、分子を横切る共役の連続性を破壊することにより、その分子はある一つの光学状態から別の光学状態に、たとえば有色から透明に変更される。電気双極子は着色剤中に設計することができ、これは、外部電界がかけられるか又は変更されるときに、染料分子又は顔料分子のある特定の部分を他の部分に対して回転させるか、そうでなければ歪ませることにより、この破壊を物理的に引き起こすことができる。

【0055】着色剤層301は、共役の強い向きにおいて着色され（たとえば黒、シアン、マゼンタ又は黄）、共役の弱い向きにおいて透明であることが好ましい分子の均質な層である。当接する背景基板303を白色とすることにより、着色剤層301は、高コントラストの白黒、及び有色の画像を生成することができる。着色剤層301は、電界により切換え可能な単色の染料又は顔料を含む場合があり、あるいは集合的に合成色（たとえば黒色）を生成する種々の切換え可能な染料又は顔料の混合物を含む場合がある。分子着色剤を使用することにより、生成される画像の解像度は、電極アレイ307、309によって生成される電界解像度によってのみ制限される。分子着色剤はさらに、概ね瞬時の切換え速度を有し、高速走査の要件に有用である（以下に図5に関して説明する）。ある特定の場合には、分子着色剤をポリマー層内に含むことができる。このようなコーティングを生成するためのポリマーはよく知られており、たとえばアクリルート、ウレタン及び類似のものを含む。代替的には、着色剤層301はそれ自体組み立てられる。自己組織化される場合がある。

【0056】一実施形態では、着色剤層301は、マトリクスアドレス指定液晶フラットパネルディスプレイのた

めの基板として提供される。このようなディスプレイの場合によく知られているように、各画素は、固定位置の電極アレイ、たとえば307、309の行及び列を通してアドレス指定される。固定位置の電極アレイ307、309は、着色剤層301を挟み、画素の重なり合う格子（マトリックス）を形成する従来のクロスバー電極311、313からなり、各画素は、電極が重なり合う場所においてアドレス指定される。クロスバー電極311、313は、電極の行及び列に配列されている離隔して平行に配置される線からなり、行及び列の電極は着色剤層301の両側に分離されている。第1の組の透明なクロスバー電極307（以下にさらに詳細に記載される図4の401及び402）は、透明な基板（たとえばガラス）上に付着されている酸化インジウムスズ（ITO）の薄膜によって形成されている。これらのアドレス指定可能な画素クロスバー行電極307は、従来の薄膜バーニング及びエッティング技術を利用して、ITO層内に形成される。着色剤層301及び背景基板303は順次、従来の薄膜技術（たとえば蒸着）又は厚膜技術（たとえばシルクスクリーン、スピンドルコーティング等）

を利用して、透明電極層上にコーティングされ、あるいは取着される。さらに別のコーティング技術は、ラングミュアープロジェット付着及び自己組織化单分子膜、單一層を含む。アドレス指定可能な画素クロスバー列電極309（図4では402、404）は、行電極307と同じようにして構成されることが好ましい。アドレス指定可能な画素クロスバー列電極309を随意的に別個の基板上に構成することができ、その基板はその後、従来の技術を利用して白色コーティングに接着される。

【0057】このディスプレイ300、400は、既知の液晶着色剤の場合に必要とされる偏光層を排除することにより、紙の上の印刷物のようなコントラスト、色、視角及び全環境照明認証性をもたらす。また上記のディスプレイを利用するにより、電力の消耗を著しく低減できるようになる。液晶は静止画像の場合でも保持電界を必要とするのに対して、本願発明の着色剤層301の分子は、双安定分子が使用されているときに、電界が存在しない形態とができる。したがって本願発明の双安定着色剤層301は、ある画素が変更されるときに、その画素に対してのみ電界を必要とする。電力及び画質の改善は、装置（たとえば腕時計、計算機、携帯電話又は他の移動体電子装置）、テレビ画面及びコンピュータディスプレイに対する幅広い視認及び照明条件下で、バッテリ寿命及びディスプレイ可読性において著しい利益をもたらす。さらには着色剤層は、解像度が低いカラーディスプレイに対して、種々の色からなる双安定着色分子のアレイを利用する有色画素のモザイクを含む場合がある。

【0058】着色剤層301内の各着色剤分子が着色剤吸収帯の外側では透明であるので、最近市販されているものよりも高い解像度のカラーディスプレイを製造するために、多数の着色剤層を重ね合わせ、個別にアドレス指

定することができる。図4は、この第2の実施形態の概略図である。高解像度、フルカラーのマトリクスアドレス指定可能ディスプレイ画面400は、交互に層を形成する透明電極、行電極401、403及び列電極402、404と、それぞれ異なる有色分子アレイを有する複数の着色剤層405、407、409とを含む。各着色剤層内の各画素は着色される場合があり、又は透明な場合があるので、所与の画素の色は、そのディスプレイの最大アドレス解像度において、有色層（たとえばシアン、マゼンタ、黄、黒）の任意の色あるいはその組み合わせから形成される。1つの画素に対して全ての着色剤層405、407、409が透明とされる場合には、その画素は背景基板303（たとえば白色）を示す。このようなディスプレイは、同じ画素密度を有するが、単層のモザイク色による現在のマトリクスLCD装置よりも3倍以上解像度の点で優れている。このディスプレイの製造の詳細は、先に記載した同時係属中の特許出願に記載されている。

【0059】各画素に対して設定される色は、選択された有色層に直に隣接する電極間に電圧を印加することによりアドレス指定される。たとえば黄色が最も上の着色剤層405であり、マゼンタが次の着色剤層407であり、シアンが第3の着色剤層409であると仮定すると、黄色層内の画素は行電極401及び列電極402を介してアドレス指定され、マゼンタは列電極402及び行電極403を介してアドレス指定され、シアンは行電極403及び列電極404を介してアドレス指定される。各着色剤分子が、電界がかけられていない場合でも安定した色を有するので、この単純な共通電極アドレス指定方式が可能になる。

【0060】図5は、マトリクスアドレス指定ではなく走査アドレス指定を利用する第3の実施形態を示す。各線が画素の行及び列をディスプレイ領域の外側エッジに接続され、ディスプレイの比較的大きな二次元表面上にバターニングされる多数のアドレス線及び間隔によって、マトリクスアドレス指定ディスプレイは現時点では解像度が制限される。この第3の実施形態では、双安定分子着色剤層301及び背景基板303の層の構成が、走査式電極アレイプリントヘッドと組み合わされて、市販の出版物の解像度に加えて、上記の最初の2つの実施形態と同じ可読性の利点を有する走査式電極ディスプレイ装置500を提供する。走査式電極アレイ及び駆動電子回路は、静電プリンタと共にあり、その構成及びインターフェースは既知である。基本的には、双安定分子スイッチが保持電界を必要としないことを思い出すと、走査式電極アレイディスプレイ装置500は、一度に1つの画素行を印刷することにより、表示される画像を変更する。したがって走査式電極アレイディスプレイ装置500は、アレイの両側に沿って奇数及び偶数電極アドレス線を交互に配置し、通り抜けてアレイを接続する多数のアドレス層を含み、かつ一度の走査中に比例して重なる多数のアレイを互い違いに配置することにより、さらに高い解

像度をもたらす。着色剤層301は、再び色モザイクでバターニングされ、非常に優れた高解像度の走査式カラーディスプレイを製造することができる。

【0061】より具体的には、図5に示す第3の実施形態は、ディスプレイ画面502と、走査式電極アレイ504と、画面の表面にわたって電極アレイを正確に移動させるためのアレイ平行移動機構501を含む。ディスプレイ画面502は再び、背景基板303と、透明な透過視認層305と、少なくとも1つの双安定分子着色剤層301を含む。

10 着色剤層301は、本願発明で上述したように、均質な単色着色剤（たとえば黒色）又は色モザイクを含む。走査式電極アレイ504は、背景基板303と接触するか、又はその近くにある電極の線形アレイ又は同等の互い違いに配置されるアレイを含む。互い違いに配置される電極のアレイは、たとえば、そうでなければ隣接する電極間の電界のクロストークを最小限に抑え、かつディスプレイの解像度を高めるために利用される。

【0062】動作において、各電極は、画素列に沿った所与の画素位置において着色剤層301にかけられる

20 「E」を付された矢印によって表される適切な電界を与えるような大きさに寸法決めされ、配置され、電気的にアドレス指定される。電界Eは、着色剤分子の色の切換え軸に応じて、着色剤層301の面に垂直に、又はそれと平行に向けられる。垂直な電界は、電極アレイの反対側にあるコーティング面に共通電極（たとえばITO層）を配置することにより生成することができる。また電極アレイは、フリンジ電界を放出するように構成することができる。平行なフリンジ電界は、アレイに隣接して、かつ平行に共通電極を配置することにより生成することができる。垂直なフリンジ電界は、電極アレイの周囲に対称に離隔して位置する平行な共通電極を配置することにより生成することができる。電圧は、アレイ504の真下に形成される支配的な電気力線が、アドレス指定される着色剤分子を切り換えるだけの十分な強さを有し、分割された折り返しの電気力線が強くならないように調整される。代替的な実施形態及び走査機構に関するさらなる情報は、先に挙げた同時係属中の特許出願に説明されている。

【0063】本願発明
40 本願発明の分子システムは、限定はしないが、メモリ、論理素子、マルチブレクサ、デマルチブレクサ、集積回路用の構成変更可能な配線、フィールドプログラマブルゲートアレイ（FPGA）、クロスバースイッチ、交差バースイッチ、及び携帯電話、移動体装置、携帯情報端末（PDA）、ディスプレイ、光スイッチのような通信装置を含む種々の応用形態において用途が見つかるものと予想される。

【0064】本願発明は、外部電界で切り換えることができる能動電子素子に分子を変える。その全般的な概念は、分子を、大きな双極子モーメントを有し、かつ固定

化される分子の他の2つの部分（固定子）を結合する回転可能な中間部分（回転子）にすることである（以下の例1 a及び1 bを参照）。かけられた電界の影響下で、回転子のベクトル双極子モーメントは、外部電界の方向に平行に整列しようとする。しかしながら、その分子は、固定子に対して特定の向きに回転子を安定化させる水素結合又は双極子-双極子相互作用のような分子間及び／又は分子内力、並びに立体斥力が存在するように設計される。したがって、かけられた電界の方向が回転子の双極子の方向と対向する場合には、回転子がその初期の向きから離れ、固定子に対して回転できるようになるために、大きな電界が必要とされる。一旦、ある特定の向きに切り換えられたなら、分子は、再度切り換えられるまで、その向きを保持する。しかしながら、分子設計の重要な要素は、回転子が半周期の 180° を通り越して回転しないようにする分子内及び／又は分子間立体斥力が存在することである。代わりに、その回転は、固定子及び／又は回転子の大きな原子団の立体斥力によって、初期の向きから約 $10^\circ \sim 170^\circ$ の角度で停止される。さらに、この $10^\circ \sim 170^\circ$ の向きは、異なる1組の分子間及び／又は分子内水素結合あるいは双極子相互作用によって固定され、したがってかけられた電界がオフ、切られた後でも所定の位置に保持される。スイッチ分子の場合、固定子から約 $10^\circ \sim 170^\circ$ だけ離隔された2つの状態間に回転子を保持するこの能力は、非常に重要である。

【0065】回転子と固定子とが全て同一面上に配向している場合、分子は完全に共役する。したがって、分子のπ電子又はπ電子及び非結合電子は、分子の大部分にわたって非局在化される。これは、その分子に対するオン状態（高導電率状態又は光学状態I）である。回転子が固定子に対して $10^\circ \sim 170^\circ$ だけ回転される場合に、分子の共役は破壊され、分子のπ電子又はπ電子及び非結合電子は、もはや分子の大部分にわたって非局在化されない。これは、その分子のオフ状態（低導電率状態又は光学状態II）である。したがって分子は、オン状態とオフ状態の間で可逆的に切り換えられる。

【0066】以下の要件が満たされなければならない。

【0067】(a) 分子は1つ以上の回転子部分と2つ以上の固定子部分とを有さなければならぬ。

【0068】(b) 分子のある一つの状態では、分子（1つ又は複数の回転子及び複数の固定子）の大部分にわたって延在するπ電子が非局在化されるべきであり、他の状態では、π電子は1つ又は複数の回転子及び複数の固定子上に局在化される。

【0069】(c) 1つ又は複数の回転子及び複数の固定子間の接続ユニットは、(1)非結合電子、又は(2)π電子、又は(3)π電子及び非結合電子を有する1つのο結合あるいは少なくとも1つの原子とすることができます。

【0070】(d) 1つ又は複数の回転子及び1つある

いは複数の固定子の非結合電子、π電子、又はπ電子及び非結合電子は、電界によって活性化される際に、1つ又は複数の回転子が回転する間に、分子の配座に応じて、局在化あるいは非局在化可能である。

【0071】(e) 分子の1つ又は複数の配座は電界に依存するか、あるいは双安定である。

【0072】(f) 1つ又は複数の双安定状態は、水素結合、クーロン力、ファンデルワールス力、金属イオン錯体あるいは双極子相互安定化のような分子内又は分子間力によって達成可能である。

【0073】(g) 分子のバンドギャップは、分子の非結合電子、又はπ電子、又はπ電子及び非結合電子の非局在化の程度に応じて変化する。これにより、分子の導電率及び光学特性（たとえば色及び／又は屈折率等）が制御される。

【0074】本願発明の新規な2モード分子は、外部電界によって切り換えることができる能動電子素子及び／又は光学素子である。その全般的な概念は、大きな双極子モーメントを有し、かつ固定化されている分子の他の

2つの部分（固定子）を結合する回転可能な中間部分（回転子）に分子を設計することである（以下の例1 a及び1 bを参照）。かけられた電界の影響下で、回転子のベクトル双極子モーメントは、外部電界の方向に平行に整列しようとする。しかしながらその分子は、固定子に対して特定の向きに回転子を安定化させる水素結合又は双極子-双極子相互作用のような分子間及び／又は分子内力、ならびに立体斥力が存在するように設計される。したがって回転子がその初期の向きから離れ、固定子に対して回転するために、大きな電界が必要とされる。

【0075】一旦、ある特定の向きに切り換えられたならば、分子は、再度切り換えられるまで、その向きに保持される。しかしながら分子設計の重要な要素は、回転子が半周期の 180° を通り越して回転しないようにする立体斥力又はクーロン斥力が存在することである。代わりに、その回転は、固定子及び回転子の大きな原子団の立体斥力によって、初期の向きから典型的には $10^\circ \sim 170^\circ$ の光学的及び／又は電気的に有意な角度で停止される。例示を目的として、この角度は、本願発明では 90° として示す。さらに、この切換えの向きは、異なる1組の分子間及び／又は分子内水素結合、あるいは双極子相互作用によって固定される場合があり、したがってかけられた電界がオフされた後でも、所定の位置に固定される。スイッチ分子の場合、固定子から光学的及び／又は電気的に有意な回転により離隔された2つの状態間に回転子を保持するためのこの能力は、非常に重要である。

【0076】さらに分子を、高速であるが揮発性の切換えのための活性化障壁がないか又は低い場合を含むように設計することができる。この後者の場合では、双安定性は必要ではなく、分子は、電界によってある一つの状

態に切り換えられ、電界を除去することによって、その元の状態に戻される（「2モード」）。実際には、2モード分子のこれらの形態は「自己消去型」である。対照的に、双安定性分子の場合、その分子は、電界が除去されてもその状態を維持し（不揮発性スイッチ）、その場合の活性化障壁の存在によって、分子を切り換えて以前の状態に戻すためには、逆の電界をかける必要がある。

【0077】1つ又は複数の回転子及び複数の固定子が全て同一面上にある場合、その分子は「共役が強い」と呼ばれる。したがって分子の非結合電子、又はπ電子、又はπ電子及び非結合電子は、分子の大部分にわたって非局在化される。これは、その分子の「オン状態」、又は「赤方偏移状態」（「光学状態I」）及び／又は「高導電性状態」と呼ばれる。1つ又は複数の回転子が固定子に対する共役から回転されている場合には、分子の共役は破壊され、π電子、又はπ電子及び非結合電子が分子の小さな部分に局在化され、「共役が弱い」と呼ばれる。これは、その分子の「オフ」状態、又は「青方偏移状態」（「光学状態II」）及び／又は「低導電性状態」である。したがって着色剤分子は、2つの異なる光学状態間で可逆的に切り換えることが可能である。たとえば例1a及び1bには、回転子の90°の回転が示されているが、その回転は実際には、先に説明したように、共役を破壊する任意の角度とすることができることが明らかである。

【0078】理想的な場合には、1つ又は複数の回転子及び複数の固定子が完全に同一面上にあるときには、分子は完全に共役し、1つ又は複数の回転子が複数の固定子に対して、たとえば90°の角度で回転しているときは、分子は共役しないことが、当業者には理解されよう。しかしながら、熱ゆらぎのために、これらの理想的な状態は完全には実現されず、したがって分子は、前者の場合には「共役が強い」（又は「導電性が高い」）と呼ばれ、後者の場合には「共役が弱い」（又は「導電性が低い」）と呼ばれる。さらに用語「赤方偏移」及び「青方偏移」は、色相に対する何らかの関係を伝えることを意味するのではなく、HOMO状態とLUMO状態の間のギャップのエネルギー偏移、エネルギーシフトの電磁エネルギースペクトルの方向を伝えることを意味する。

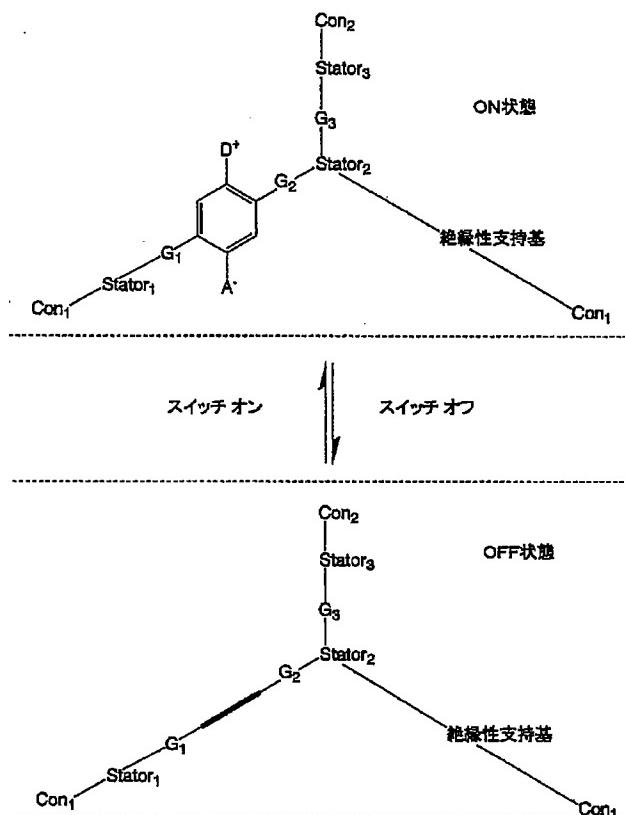
【0079】図6は、分子配座の変化を介して、電界によって引き起こされるバンドギャップの変化を示す（回転子／固定子タイプのモデル）本願発明の分子システムの概略的なモデルを示す。分子システム30は3つの分岐32、34、36（第1、第2、第3の分岐）を有し、各分岐の一端は接合ユニット38に接続されて「Y」字形状を形成する。第1の分岐32及び第2の分岐34は接合ユニット38の一方の側にあり、第3の分岐36は接合ユニットの、第1の分岐32及び第2の分岐34とは反対側にある。第1の分岐32はそのバックボーンに第1の固定子ユニット40を含み、接合ユニット38は第2の固定子ユニットを含み、第1の分岐はさらに、第1の固定子ユニットと第2の固定子ユニットとの間のバックボーンに回転子42ユニットを含む。回転子ユニット42は、電極44、46によってかけられる外部電界に応答して、2つの固定子ユニット38、40に対して2つの状態間で回転する。分子ユニット30は、接続ユニットにより電極44、46に直接接続されるか、あるいは2つの電極間に懸垂、又は自由に動くよう取り付けられるかのいずれかの場合がある（図6には示さないが、例1a及び1bを参照して以下に示す）。第2の分岐34は、第1の分岐32の長さと実質上等しい長さの第2の分岐を設けるために、そのバックボーンに絶縁性の支持基を含む。

【0080】以下の例1a及び1bは、分子を切り換える2つの異なる向きを示す。それらの例では、回転子の回転軸が、分子の配向軸に対して30°～70°の角度にあるように設計されている。分子の「Y」字形状は、回転子の双極子モーメントを「オン」状態の電極間の電界の方向に沿って配向するために選択される。これは、双極子モーメントと電界の間の相互作用の強さを最大にする。この設計により、所望の結果に応じて、分子薄膜及び電極の種々の幾何学的形状を利用することが可能となる。

【0081】最初に例1aを参照すると、これは本願発明のための第1の一般的な分子の例を示す。それに続く例1bは、具体的な分子システムを示す。

【0082】

【化1】例1a



【0083】ここで、記号A⁻は受容体基を表す。すなわちそれは電子求引基である。それは、水素、カルボン酸又はその誘導体、硫酸又はその誘導体、リン酸又はその誘導体、ニトロ基、シアノ、ヘテロ原子（たとえばN、O、S、P、F、Cl、Br）、上記のヘテロ原子のうちの少なくとも1つを有する官能基（たとえばOH、SH、NH等）、炭化水素（飽和又は不飽和のいずれか）、あるいは置換炭化水素のうちの1つである。

【0084】記号D⁺は供与体基を表す。すなわち、それは電子供与基である。それは、水素、アミン、OH、SH、エーテル、炭化水素（飽和又は不飽和のいずれか）、置換炭化水素、あるいは少なくとも1つのヘテロ原子（たとえばB、Si、I、N、O、S、P）を有する官能基のうちのいずれか1つである。供与体は、分子上の受容体基より電気的陰性が低いか、あるいは電気的陽性、貴な電位が高いという事実により受容体から区別される。

【0085】記号Con₁及びCon₂は、1つの分子と別の分子、又は1つの分子と基板（具体的な応用形態に応じて電極又は非電極のいずれか）との間の随意選択的な接続ユニットを表す。それらは、水素（水素結合を利用する）、多価ヘテロ原子（すなわちC、N、O、S、P等）、これらのヘテロ原子を含む官能基（たとえばNH、PH等）、炭化水素（飽和又は不飽和のいずれか）、あるいは置換炭化水素のうちの任意の1つであ

30

40

50

る。

【0086】記号Stator₁、Stator₂、Stator₃は、本願発明では、異なる幾何学的形状の固定された共役システムを示すために利用されている。それらは、炭化水素（飽和又は不飽和のいずれか）、あるいは置換炭化水素である。典型的には、これらの炭化水素ユニットは、分子が平面状態（赤方偏移状態）にあるとき、分子の延在した共役に寄与する共役環を含む。それらの固定子ユニットでは、炭化水素ユニットは、架橋を形成するブリッジング基G_n及び／又は空間を形成するスペーシング基R_nを含む。ブリッジング基（たとえばアセチレン、エチレン、アミド、イミド、イミン、アゾ等）は典型的には、所望の電気的特性及び／又は光学的特性を達成するために、固定子を回転子に接続するため、あるいは2つ以上の共役環を接続するために利用される。代替的に、接続子は、酸素原子によるエーテル架橋、又は回転子と固定子の間の直接の結合のような単一の原子架橋を含む。スペーシング基（たとえばフェニル基、イソプロピル基又はt-ブチル基等）は、各回転子が所望の動きの範囲にわたって回転するための空間を設けながら、適切な3次元の足場、スカフォードを設けて分子をともに詰め込むことができるようにするために用いられる。

【0087】用語「絶縁性支持基」は、本願発明では、非導電性でありかつ単に支持基を示すために使用されている。それは、分子を構造的に支持し、分子の熱振動を

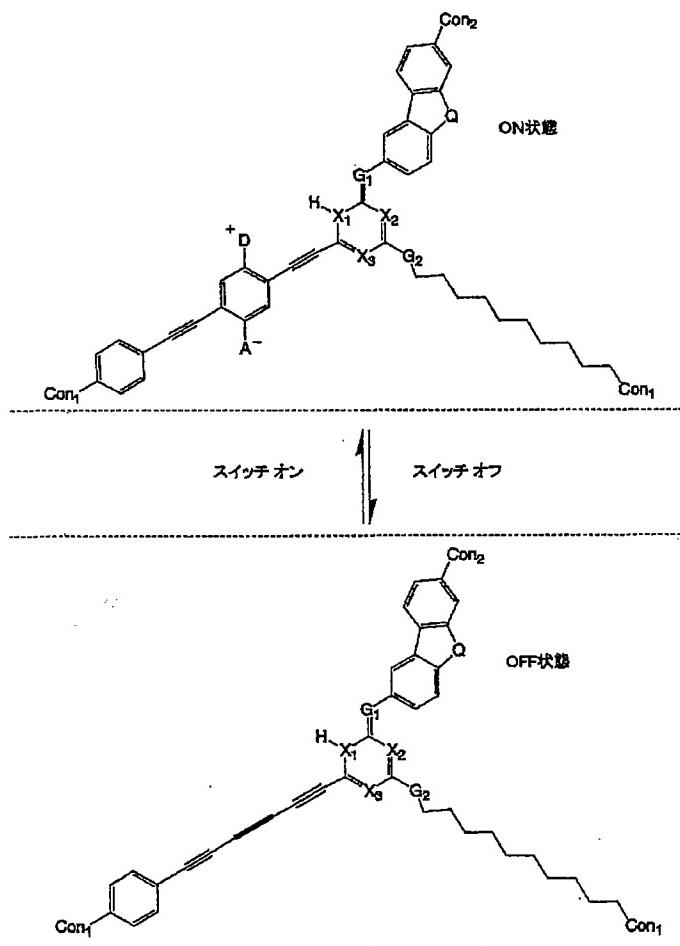
低減し、分子が比較的高い温度でも分子が剛性及び安定性を確実に保持するようにするように、「追加の脚」(又は分歧)のように機能する。分子に少なくとも1つの「追加の脚」を導入することは、「強い共役」及び「弱い共役」状態が熱によって広がるのを防ぎ、それにより電子スイッチのオン／オフ比又は光スイッチの色差を最大にする際に重要であることに言及することは価値がある。「追加の脚」は、延在する共役又は電気伝導に全く関係することなく、純粹に支持機能を果たすべきで*

*ある。それは、炭化水素(飽和又は不飽和のいずれか)あるいは置換炭化水素である。

【0088】以下の例1bは、本願発明の一実施形態の現実の分子の一例である。実施例1bでは、回転子の回転軸は、分子の正味の導電軸に対して30°～70°の角度をなすように設計されている。

【0089】

【化2】例1b



【0090】ここで、記号A⁻は受容体基を表す。すなわちそれは電子求引基である。それは、カルボン酸又はその誘導体、硫酸又はその誘導体、リン酸又はその誘導体、ニトロ基、シアノ、ヘテロ原子(たとえばN、O、S、P、F、Cl、Br)、上記のヘテロ原子のうちの少なくとも1つを有する官能基(たとえばOH、SH、NH等)、炭化水素(飽和又は不飽和のいずれか)あるいは置換炭化水素のうちの1つである。

【0091】記号D⁺は供与体基を表す。すなわちそれは電子供与基である。それは、水素、アミン、OH、SH、エーテル、炭化水素(飽和又は不飽和のいずれか)、置換炭化水素、あるいは少なくとも1つのヘテロ電子(たとえばB、Si、I、N、O、S、P)を有する

官能基のうちのいずれか1つである。供与体は、分子上の受容体基より電気的陰性が低い、又は電気的陽性が高いという事実により受容体から区別される。

【0092】記号Con₁及びCon₂は、1つの分子と別の分子、又は1つの分子と固体基板の間の随意選択的な接続ユニットを表す。それらは、単一の接続ユニット又は多数の接続ユニットとすることができます。それらは、水素(水素結合を利用する)、多価ヘテロ原子(すなわちC、N、O、S、P等)、これらのヘテロ原子を含む官能基(たとえばNH、PH等)、炭化水素(飽和又は不飽和のいずれか)、あるいは置換炭化水素のうちの任意の1つである。

【0093】記号X₁、X₂、X₃は、環構造に組み込

まれる同調ユニットを表す。これらのユニットの機能は、分子の電子的特性及び／又は光学的特性を調整、同調し、かつかけられた外部電界の影響下で、環構造を円滑に、及び所望の互変異性化の遷移が確実にできるようになることである。それらは、ヘテロ原子（すなわちN、P、As等）、炭化水素、あるいは置換炭化水素のうちの任意の1つである。

【0094】記号G₁及びG₂はブリッジング基を表す。これらのブリッジング基の機能は、固定子及び回転子を接続するか、又は2つ以上の断片を接続して、所望の分子特性を達成することである。それらは、ヘテロ原子（すなわちN、O、S、P等）、上記のヘテロ原子のうちの少なくとも1つを有する官能基（たとえばNH又はNHNH等）、炭化水素（飽和又は不飽和のいずれか）、あるいは置換炭化水素の任意の1つである。代替的には、接続子は、酸素原子によるエーテル架橋、あるいは回転子と固定子の間の直接σ結合のような单一の原子架橋を含む。

【0095】文字Qは、ここでは、2つのフェニル環の間の接続ユニットを示すために使用されている。それは、S、O、NH、NR、炭化水素、あるいは置換炭化水素のうちの任意の1つとすることができる。

【0096】文字Hは、ここでは、水素原子を示すために利用されている。

【0097】上記の例1bでは、水平方向の点線は、その分子が随意選択的に結合される他の分子又は個体基板（それは、応用形態に応じて、電極又は非電極のいずれともすることができる）を表す。切換え電界の方向は水平方向の点線に垂直である。代替的には、結合成分（Co_{n1}及びCo_{n2}）を排除することができ、分子は単に2つの電極間に配置される場合がある。上記（例1b）に示す分子は、分子全体の配向軸に対して30°～70°の角度をなす内部回転子により設計されている。この場合、外部電界は、図に示されるように、分子の配向軸に沿ってかけられる。電極（水平方向の破線）は紙面に垂直に、かつ分子の配向軸に対して30°～70°の角度をなして向きを定められている。図の上から下に向かれる電界をかけることにより、上側の図に示すような回転子が、下側の図に示す位置まで回転され、逆もまた成り立つ。この場合、下側の図に示される回転子が分子の残りの部分と同一面上にはないので、これは分子の「オフ」状態であるのに対して、上側の図では回転子が分子の残りの部分と同一面上にあるので、これは分子の「オン」状態である。

【0098】例1bに示す分子が、共役が弱い状態（又は「オフ」状態）であるとき、分子の導電性は低く、その色は色彩的には透明であり、すなわちそのπ構造の「局在化された状態」では青方偏移される。共役の強い状態（「オン状態」）では、その分子は明らかに高い導電率を示し、分子の色は赤方偏移される。

【0099】例1bの分子の場合、たとえばラングミュアープロジェット技術又は自己組織化单分子層を利用して单一の单分子膜を成長させ、分子の配向軸が、分子を切り換えるために利用される電極の面に対して垂直になるようにする。電極は、Collier等（前掲）によって記載されるようにして、又は先に引用された特許出願に記載される方法を利用して付着することができる。代替的な厚膜付着技術には、気相成長、接触又はインクジェットプリントティング、あるいはシルクスクリーンを挙げることができる。

【0100】本願発明の電界により切換え可能な分子は、図1～図5に示す電気スイッチ又は光スイッチの用途において、ならびに上記のような他の電気的用途及び光学的用途において使用することができる。

【0101】具体的には、本願発明は、従来の技術から区別される新しいタイプの切換え機構、すなわち分子のバンドギャップを変化させるために、分子の回転可能な部分（回転子）の、電界により誘導される回転を導入する。従来技術のアプローチとは対照的に、スイッチを切り換える際に、その分子は決して酸化も還元もされない。また分子の運動する部分は、非常に小さいため、切換え時間、スイッチング時間が非常に短くなることが期待される。またその分子は単純であり、それゆえロタキサン、カテナン及び関連する化合物よりも容易に、かつ低コストで製造することができる。

【0102】交差したワイヤ（マイクロメートル又はナノメートル）を形成するために本明細書において開示され、特許請求される技術を利用して、種々の機能を実行し、マイクロスケール、さらにはナノスケール上で演算を実行するための種々の有用な素子及び回路を形成することができる。たとえば応用形態には、信号のルーティング及び通信用の分子ワイヤクロスバー接続（MWCI）、分子ワイヤクロスバーメモリ（米国特許第6,128,214号）、プログラマブルロジックアレイを利用する分子ワイヤクロスバーロジック（MWCL）、分子ワイヤクロスバーネットワーク用のデマルチブレクサ、分子ワイヤトランジスタ、及びディスプレイ用の画素アレイが含まれる。たとえば図2に示すように、本願発明のスイッチ10を、二次元のアレイとして繰り返し、複数のスイッチ、すなわちスイッチのアレイ60を形成し、クロスバースイッチを形成することができる。

【0103】さらに、光スイッチ（マイクロメートル又はナノメートル）を形成するために本明細書において開示され、かつ特許請求される技術を利用して、ディスプレイ、電子ブック、書換え可能媒体、電気的に調整可能な光学レンズ、ウインドウ及びミラー用の電気制御式の着色体、多数の着信チャネルのうちの1つから多数の発信チャネルのうちの1つに信号をルーティングするための光クロスバースイッチ等を製造することができる。

本明細書に開示される電界切換え式分子は、種々の視認ディスプレイを含むマイクロスケール及びナノスケール電子装置、ならびにマイクロスケール、さらにはナノスケールの構成要素から構成される光学装置において用途が見出されるものと予想される。

【0105】以下においては、本願発明の種々の構成要件の組み合わせからなる例示的な実施態様を示す。

1. 第1の分岐（32）、第2の分岐（34）及び第3の分岐（36）の3つの分岐（32、34、36）を有し、各分岐（32、34、36）の一端が接合ユニット（38）に接続されて「Y」字形状を形成し、前記第1の分岐（32）及び前記第2の分岐（34）が前記接合ユニット（38）の一方の側にあり、前記第3の分岐（36）が前記接合ユニット（38）のもう一方の側にある分子システム（30）であって、（a）前記第1の分岐（32）が、そのバックボーンに、動かない第1の固定子ユニット（40）を含み、前記接合ユニット（38）が、動かない第2の固定子ユニット（38）を有し、さらに前記第1の分岐（32）が、そのバックボーンにおいて、前記第1の固定子ユニット（40）と前記第2の固定子ユニット（38）の間に回転可能な回転子ユニット（42）を含み、（b）前記第2の分岐（34）が、そのバックボーンに、前記第1の分岐（32）の長さと実質上等しい長さの前記第2の分岐（34）を設けるための絶縁性支持基を含み、前記回転子ユニット（42）が、外部から印加される電界の関数として2つの状態間で回転する分子システム。

【0106】2. 前記第3の分岐（36）が、そのバックボーンに、動かない第3の固定子ユニットを含む1項に記載の分子システム。

【0107】3. さらに前記第1の分岐（32）、前記第2の分岐（34）及び前記第3の分岐（36）が、その端部にそれぞれ接続ユニットを含み、この接続ユニット

が、前記分子システム（30）を、他の分子システム（30）又は電極（44、46）に接続する1項に記載の分子システム。

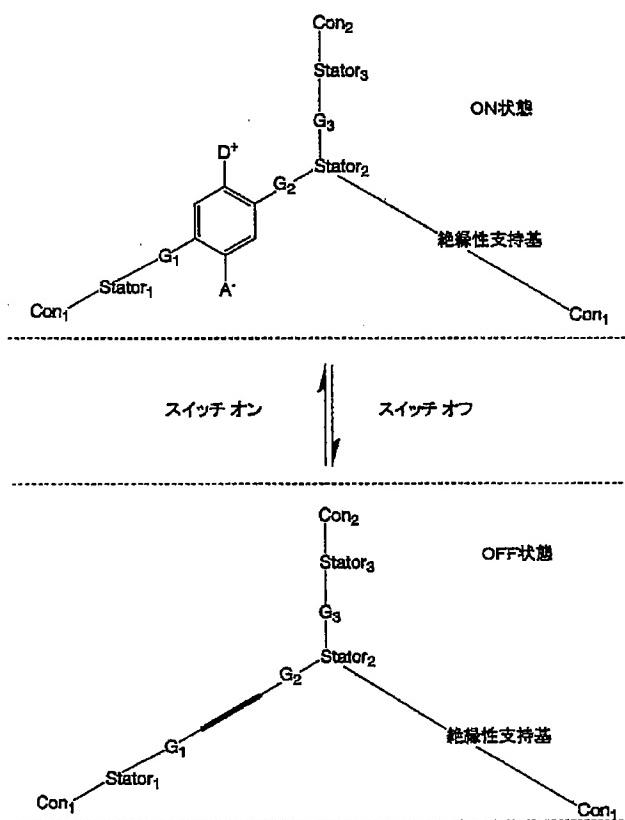
【0108】4. さらに前記第1の分岐（32）が、少なくとも1つのブリッジング基と少なくとも1つのスペーシング基からなるグループから選択される少なくとも1つの成分を含み、前記少なくとも1つのブリッジング基が、前記固定子（38、40）を前記回転子（42）に接続するか、又は少なくとも2つの共役環を接続して電気的な効果及び光学的な効果からなるグループから選択される所望の効果を達成し、前記少なくとも1つのスペーシング基が、前記回転子（42）がそれぞれ所望の動きの範囲にわたって回転するための空間を設けながら、適切な3次元の足場を設け、前記分子システム（30）が他の分子システム（30）とともに詰め込まれることができるようとする1項に記載の分子システム。

【0109】5. 前記第1の分岐（32）及び前記第2の分岐（34）がそれぞれ第1の電極（46）に接続され、前記第3の分岐（36）が第2の電極（44）に接続され、それによって前記外部から印加される電界が接続されて、電気的スイッチが形成される1項に記載の分子システム。

【0110】6. 前記分子システム（30）が、前記第1の分岐（32）及び前記第2の分岐（34）がそれぞれ前記第1の電極（46）に電気的に関連付けられ、前記第3の分岐（36）が前記第2の電極（44）に電気的に関連付けられるように、2つの前記電極（44、46）間で自由に動くように取り付けられ、それによって前記外部から印加される電界が接続され、光学的なスイッチが形成される1項に記載の分子システム。

【0111】7.

【化3】



の一般的な構造を有する1項に記載の分子システム。ただし記号A⁻は、(a)水素、(b)カルボン酸又はその誘導体、(c)硫酸又はその誘導体、(d)リン酸又はその誘導体、(e)ニトロ基、(f)シアノ、(g)N、O、S、P、F、Cl、Brからなるグループから選択されるヘテロ原子、(h)前記ヘテロ原子のうちの少なくとも1つを有する官能基、(i)飽和又は不飽和炭化水素、及び(j)置換炭化水素からなるグループから選択される電子求引基を含むアクセプター基であり、D⁺は、(a)水素、(b)アミン、(c)OH、(d)SH、(e)エーテル、(f)飽和又は不飽和炭化水素、(g)置換炭化水素、及び(f)B、Si、I、N、O、S、Pからなるグループから選択される少なくとも1つのヘテロ原子を有する官能基からなるグループから選択される電子供与基を含むドナー基であり、このドナー基は前記アクセプター基より電気的陽性が高く、Con₁及びCon₂は、1つの分子システムと別の分子システムとの間、あるいは1つの分子システムと個体基板との間の随意選択的な接続ユニットであり、この接続ユニットは、(a)水素(水素結合を利用する)、(b)C、N、O、S、Pからなるグループから選択される多価ヘテロ原子、(c)前記ヘテロ原子を含む官能基、(d)飽和又は不飽和炭化水素、及び(e)置換炭化水素からなるグループから選択され、Stator₁、Stator₂、Stator₃は、(a)飽和又は不飽和炭化水素、及び(b)置換炭化水素からなるグループから選択される異なる幾何学的形状の固定された共役システムであり、前記炭化水素ユニットは、分子が平面状態(赤方偏移状態)であるとき、前記分子システムの延在した共役に寄与する共役環を含み、前記固定子ユニットは随意選択的に、少なくとも1つのブリッジング基G_n、少なくとも1つのスペーシング基R_n又は両方を含み、前記少なくとも1つのブリッジング基は、(a)アセチレン、エチレン、アミド、イミド、イミン、及びアゾからなるグループから選択され、前記固定子を前記回転子に接続し、あるいは2つ以上の共役環を接続するのに利用されて所望の電気的特性及び/又は光学的特性を達成し、あるいは(b)单一の原子ブリッジ、及び前記回転子と前記固定子の間の直接σ結合からなるグループから選択され、前記少なくとも1つのスペーシング基は、フェニル基、イソプロピル基及びt-ブチル基からなるグループから選択され、前記回転子がそれぞれ所望の動きの範囲にわたって回転するための空間を設けながら、適切な3次元の足場を設け、前記分子システムを詰め込むことができるようするために用いられ、「絶縁性支持基」は、非導電性の支持基を示すとともに、前記分子システムを構造的に支持し、前記分子システムの熱振動を低減し、前記分子システムが比較的高い温度でも剛性及び安定性を保持するように、追加の脚のように機能し、前記絶縁性支持基は、(a)飽和又は不飽和の炭化水素及び(b)置換炭化水

30
40
40

換炭化水素からなるグループから選択される異なる幾何学的形状の固定された共役システムであり、前記炭化水素ユニットは、分子が平面状態(赤方偏移状態)であるとき、前記分子システムの延在した共役に寄与する共役環を含み、前記固定子ユニットは随意選択的に、少なくとも1つのブリッジング基G_n、少なくとも1つのスペーシング基R_n又は両方を含み、前記少なくとも1つのブリッジング基は、(a)アセチレン、エチレン、アミド、イミド、イミン、及びアゾからなるグループから選択され、前記固定子を前記回転子に接続し、あるいは2つ以上の共役環を接続するのに利用されて所望の電気的特性及び/又は光学的特性を達成し、あるいは(b)单一の原子ブリッジ、及び前記回転子と前記固定子の間の直接σ結合からなるグループから選択され、前記少なくとも1つのスペーシング基は、フェニル基、イソプロピル基及びt-ブチル基からなるグループから選択され、前記回転子がそれぞれ所望の動きの範囲にわたって回転するための空間を設けながら、適切な3次元の足場を設け、前記分子システムを詰め込むことができるようるために用いられ、「絶縁性支持基」は、非導電性の支持基を示すとともに、前記分子システムを構造的に支持し、前記分子システムの熱振動を低減し、前記分子システムが比較的高い温度でも剛性及び安定性を保持するように、追加の脚のように機能し、前記絶縁性支持基は、(a)飽和又は不飽和の炭化水素及び(b)置換炭化水

50

素からなるグループから選択される1項に記載の分子システム。

【0112】8. 少なくとも2つの動かない固定子ユニット(38、40)と前記2つの動かない固定子ユニット(38、40)の間に1つの回転可能な回転子ユニット(42)とを含み、前記分子システム(30)が、外部から印加される電界によって、第1の状態と第2の状態の間で前記分子システム(30)を切り換えるための第1の電極(46)と第2の電極(44)とに関連付けられ、前記分子システム(30)が、前記回転子ユニット(42)と前記切換え電界の間の相互作用の最大強度が3つの分岐(32、34、36)を含む「Y」字形状から生じるように構成され、前記各分岐(32、34、36)の一端が接合ユニット(38)に接続され、前記分岐のうちの2つ(32、34)が前記接合ユニット(38)の一方の側に配置され、前記分岐のうちの第3の分岐(36)が前記接合ユニット(38)のもう一方の側に配置され、前記固定子ユニット(40)のうちの一方と前記回転子ユニット(42)が前記2つの分岐のうちの1つ(32)に配置され、前記固定子ユニット(40)のうちのもう一方が前記接合ユニット(38)内に配置される1項に記載の分子システム。

【0113】9. 一対の電極(44、46)によって生成される電界内に構成され、前記電極に電気的に接続される1項に記載の分子システム(30)を含む双安定分子機械素子であって、前記回転子部分(42)が、前記電界が印加されることによって、前記固定子部分(38、40)に対して少なくとも2つの異なる状態間で回転し、それによって前記分子システム(30)内にバンドギャップの変化を引き起こし、第1の状態では、前記分子システム(30)の少なくとも大部分にわたって共役が延在し、その結果としてバンドギャップが相対的に小さくなり、第2の状態では、前記延在する共役が破壊され、結果としてバンドギャップが相対的に大きくなる双安定分子機械素子。

【0114】10. 接合部(18)を形成する一対の交差したワイヤ(12、14)を含む交差ワイヤ素子(10)を含み、一方のワイヤ(14)が他方のワイヤ(12)と0°以外の角度で交差し、少なくとも1つの接続子化学種(16)が前記接合部(18)で前記一対の交差したワイヤ(12、14)を接続し、前記接合部(18)がナノメートルの機能寸法を有し、前記少なくとも1つの接続子化学種(16)が前記分子システム(30)を含む9項に記載の双安定分子機械素子。

【0115】11. 前記分子システム(30)が、接続子ユニットによって前記一対の電極(44、46)に接続されている9項に記載の双安定分子機械素子。

【0116】12. 一対の電極(44、46)によって生成される電界内に構成される1項に記載の分子システム(30)を含む電界起動式光スイッチであって、前記回転子部分(42)が、前記電界が印加されることにより、前

記固定子部分(38、40)に対して少なくとも2つの異なる状態間で回転し、それによって前記分子システム(30)内にバンドギャップの変化が誘導され、第1の状態では、前記分子システム(30)の少なくとも大部分にわたって共役が延在し、その結果としてバンドギャップが相対的に小さくなり、第2の状態では、前記延在する共役が破壊され、結果としてバンドギャップが相対的に大きくなる電界起動式光スイッチ。

【0117】13. 前記分子システム(30)が、双安定であり、不揮発性素子をもたらす12項に記載の電界起動式光スイッチ。

【0118】14. 前記分子システム(30)が、本質的に、異なる状態間で低活性化障壁を有し、高速であるが、揮発性のスイッチをもたらす12項に記載の電界起動式光スイッチ。

【0119】15. 前記分子システム(30)が、前記分子システム(30)の光学的特性が印加される電界を連続して増減することにより調整され、揮発性スイッチを形成するか、又は少なくとも1つの活性化障壁を有するスイッチに電圧パルスを印加することにより色が突然に変更されるように、3つ以上の切換え可能な状態を有する12項に記載の電界起動式光スイッチ。

【0120】16. 前記分子システム(30)が、透明な状態と着色された状態の間、又は1つの着色された状態と別の着色された状態の間で変化する12項に記載の電界起動式光スイッチ。

【0121】17. 前記分子システム(30)が、ある一つの屈折率と別の屈折率との間で変化する12項に記載の電界起動式光スイッチ。

【0122】

【発明の効果】上記のように、本願発明によれば、化学的な酸化及び/又は還元を回避し、第1の状態から第2の状態に適度な速度で切り換えることができ、ROMのような素子を製造できるように可逆的であり、種々の電子及び/又は光スイッチにおいて用いることができる分子システムを実現することができる。本願発明は、ナノメートルスケールの可逆的な電子的スイッチ及び光学的スイッチを提供する分子システム(30)に関する。より詳細には、電界によって分子配座の変化又は互変異性化を介して生じるバンドギャップの変化が誘導される電界起動式分子スイッチに関する。バンドギャップを変化させるために、化学結合の変化を介して延在する共役を変化させることは、1つの回転部分(回転子)(42)と、その間に回転子(42)が取り付けられている2つ以上の固定部分(固定子)(38、40)とを有する分子システム(30)を提供することにより達成される。本願発明の分子システム(30)は、各分岐(32、34、36)の一端が接合ユニット(38)に接続されて「Y」字形状を形成する3つの分岐(第1の分岐、第2の分岐及び第3の分岐)(32、34、36)を有する。第1の分岐(32)及び第2の

分岐（34）は接合ユニット（38）の一方の側にあり、第3の分岐（36）は接合ユニット（38）のもう一方の側、反対側にある。第1の分岐（32）は、そのバックボーンに、第1の固定子ユニット（40）を含み、接合ユニット（38）は、第2の固定子ユニット（38）を有し、さらに第1の分岐（32）は、そのバックボーンにおいて、第1の固定子ユニット（40）と第2の固定子ユニット（38）の間に回転子ユニット（42）を含む。第2の分岐（34）は、そのバックボーンに、第1の分岐（32）の長さと実質上等しい長さの第2の分岐（34）を設けるための絶縁性支持基を含み、回転子ユニット（42）は、外部から印加される電界の関数として2つの状態間で回転する。この構成により、化学的な酸化及び／又は還元を回避し、第1の状態から第2の状態に適度な速度で切り換えることができ、ROMのような素子を製造できるように可逆的であり、種々の電子及び／又は光学素子において使用することができる分子システムを提供することができる。

【図面の簡単な説明】

【図1A】2本のワイヤの交差部に少なくとも1つの分子を有する2本の交差したワイヤの概略図である。

【図1B】図1Aに示される素子を示す斜視図である。

【図2】 6×6 のクロスバースイッチを示す本願発明のスイッチの2次元のアレイの概略図である。

【図3】本願発明にしたがって使用される2色（たとえば白黒）ディスプレイ画面構成の概略図（斜視透視図）である。

【図3A】図3に示されるディスプレイ画面の着色剤層*

* 素子の詳細図である。

【図4】本願発明にしたがって使用するためのフルカラーディスプレイ画面構成の概略図（斜視透視図）である。

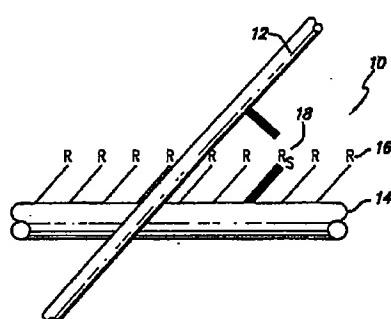
【図5】本願発明にしたがって使用するための2色ディスプレイ画面構成の走査アドレス指定の実施形態を示す概略図である。

【図6】分子配座の変化を介する電界誘導バンドギャップ変化を表すモデル（回転子／固定子タイプのモデル）の概略図である。

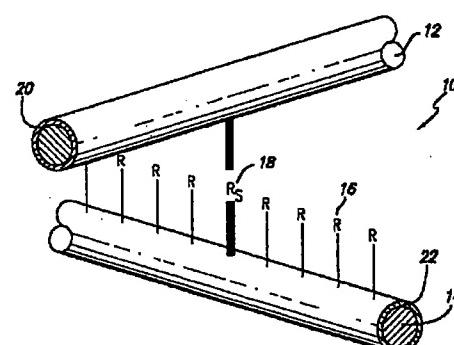
【符号の説明】

10	スイッチ
12	ワイヤ
14	ワイヤ
16	化学種
18	ワイヤ交差部
20	分子化学種
22	分子化学種
30	分子システム
32	第1の分岐
34	第2の分岐
36	第3の分岐
38	接合ユニット
40	固定子ユニット
42	回転子ユニット
44	電極
46	電極

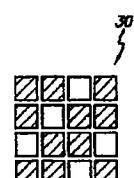
【図1A】



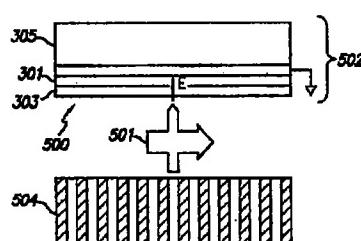
【図1B】



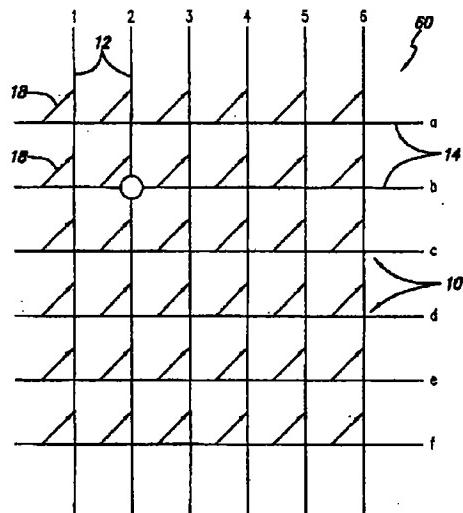
【図3A】



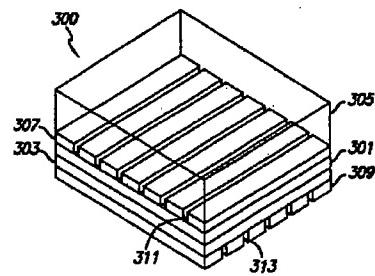
【図5】



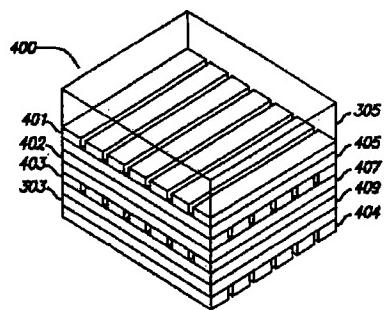
【図2】



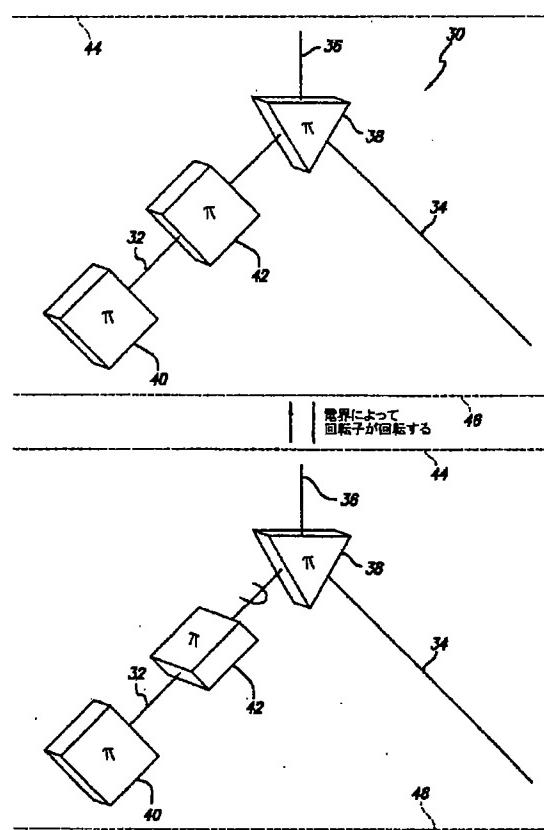
【図3】



【図4】



【図6】



フロントページの続き

(72)発明者 ツァンーリン・ツォウ
アメリカ合衆国カリフォルニア州94040,
マウンテンビュー, デル・メディオ・コー
ト・ナンバー209・2747

(72)発明者 アール・スタンレイ・ウィリアムス
アメリカ合衆国カリフォルニア州94040,
マウンテンビュー, ローレル・ウェイ・
105

(72)発明者 ケント・ピンセント
アメリカ合衆国カリフォルニア州95014,
クバチーノ, ソラ・ストリート・20863